

ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	3. 凝縮系の物性と機能
中項目	3-3. 熱物性
小項目	3-3-0. 総論

概要（200字以内）	
<p>21世紀は熱力学の時代である。20世紀においては量子力学が確立し、その成果としてのエレクトロニクスが飛躍的に発展し、我々の生活を一変させた。それは21世紀に入り、さらに加速している。曰くエレクトロニクスからフォトニクスへ、さらにスピントロニクスへ、明瞭な未来予測も示されている。しかし鮮やかなロードマップが描かれたら、それはもはや科学ではない。フロンティアにはロードマップはないのである。</p>	<div style="border: 1px solid black; padding: 10px; text-align: center;"> <p>The 21st Century “Thermodynamics Century”</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Nano-thermodynamics ○ Bio-thermodynamics ○ Environment/Energy thermodynamics <p>21世紀は熱力学の時代</p> </div>
現状と最前線	
<p>譬喩が適切でないかもしれないが、原子・分子を極限まで調べ尽くしても、その集合体としての結晶構造は予言できない。科学が興味深い事象の収集という博物学に始まり、得られた知識の集大成から規則性を見出し、最終的に法則として確立することにより、未知の現象を予測することこそ最終目標であるとすれば、我々の科学は未だ博物学の水準にあるといわねばならない。ハイテク、ナノテクにより、原子や分子をピンセットで扱うように自由に制御できるとしても、それで未知の結晶構造が予言できないという事実には、重大な意味があることを忘れてはならない。素粒子の運動方程式から人間社会を説明できないのである。自然界はギブズエネルギー極小条件で安定性が決まるのであり、その内訳はエンタルピー（エネルギー）とエントロピーの寄与である。つまりエネルギー最小条件で物質の安定性が決定できるのは、絶対零度に於いてのみであり、有限の温度ではエントロピーが重要な役割を果たしている。未だ多くの理論計算がエネルギーのみを扱い、エントロピーの寄与を取り入れていないことは大いに不足である。エントロピーとは、乱れを定量化した状態量であり、この絶対値を計測できる技法は熱測定において他には存在しない。乱れの定量化は熱測定によるエントロピー値の実測に依るほかはないのである。産業革命の後に確立した熱力学は、今や新たな展開を必要とするルネサンスを迎えている。21世紀が熱力学の時代であるといわれる所以である。フロンティアには必然的にロードマップはなく安易な未来予測はできない。本中項目レポートでは、熱力学研究分野で最先端の研究を行っておられる方々に可能な限りの提言をいただいた。いずれも的確な</p>	

指摘であり、21世紀の研究における我々の重大な責務に襟を正すべきではないだろうか。

エントロピー効果の重要性はソフトマターにおいてとりわけ顕著に現れる(齋藤一弥)。なかんずく軽水素体と重水素体の相分離は、混合エントロピーの問題として捉えるべきであり、従来の熱力学で同位元素を考慮していないことと対比すれば、新たな展開の一典型といえよう。このような事情は生物熱力学(城所俊一)においてさらに鮮明に現れる。タンパク質の一分子を熱力学の対象とする理論と精密な実験の新たな展開が必要となっている。微少系の熱力学とその実験、および新たな物質科学の創製は、ナノサーモダイナミクスとして提案されている(森川淳子)。そこではナノテクノロジーとのタイアップも必要とされている。ミクロな分子運動とマクロな性質とが直接議論される溶液の分野においても大胆な提言がされている(古賀精方)。そこでは熱力学関数の高次微分量を獲得できる実験レベルの向上が要請されている。極限環境における熱物性についても、さらなる実験技術の向上が新たな知見の獲得と新分野の開拓に向けて要請されている(中澤康浩)。同様に2次元界面における凝集機構と新物性開拓においては、画期的な応用展開も視野に入れた研究が期待されている(稲葉 章)。物質反応の熱力学においても、不均一反応と動的側面からの解析が必要とされる時代が来ている(古賀信吉)。分子エネルギーの新展開においては、化学結合エネルギーの絶対値測定を可能とする燃焼熱測定、とりわけミクロ熱測定の継続的発展が極めて重要である(長野八久)。物質の存在形態として、非平衡、非晶質状態が極めて重要であることはいうまでもない。非平衡凍結状態としてのガラス状態における構造と熱物性の相関について、理論と実験の画期的な発展が要請されている(小國正晴)。その新しい技法の一つとして動的情報を得ることができる熱容量分光法があり、画期的な発展が必要とされている(川路 均)。

将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

本中項目レポートにある課題は、いずれも極めて重要であり、かつ実現の可能性も高い。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

科学のフロンティアにはロードマップはない。本中項目レポートで提言された課題は、いずれも各著者の精一杯のものであり、実現に向けた研究条件の向上が大いに望まれる。

キーワード

熱力学, 熱測定, 構造と物性の相関, エントロピー効果, ナノサーモダイナミクス

(執筆者: 阿竹 徹)